

Berichte aus der Physik

**Frank Müller**

**Winkelaufgelöste Elektronenenergieverlustspektroskopie an  
epitaktischen Übergangsmetalloxidfilmen:  
Über das Streuverhalten niederenergetischer Elektronen bei  
der Anregung spinverbotener und spinerlaubter  
Kristallfeldübergänge in NiO (001) und MnO (001)**

Shaker Verlag  
Aachen 2002

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

*Müller, Frank:*

Winkelaufgelöste Elektronenenergieverlustspektroskopie an epitaktischen Übergangsmetalloxidfilmen: Über das Streuverhalten niederenergetischer Elektronen bei der Anregung spinverbotener und spinerlaubter Kristallfeldübergänge in NiO (001) und MnO (001) / Frank Müller.

Aachen : Shaker, 2002

(Berichte aus der Physik)

Zugl.: Saarbrücken, Univ., Diss., 2001

ISBN3-8322-0435-0

Copyright Shaker Verlag 2002

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-0435-0

ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • eMail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

Die heutigen Erkenntnisse zur elektronischen und geometrischen Struktur von Festkörpern sind auf die Anwendung einer Vielzahl elektronenspektroskopischer Untersuchungsmethoden, wie z.B. XPS, UPS, EELS, LEED u.a., zurückzuführen. All diesen Methoden ist gemeinsam, die vom Festkörper emittierten bzw. an ihm gestreuten Elektronen nach ihrer Energie-, Impuls- und Spinverteilung zu analysieren. Unter all diesen Verfahren nimmt die Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) eine Sonderstellung ein, da hier sowohl die Anregung des Festkörpers als auch der Nachweis seiner elektronischen Eigenschaften über Elektronen erfolgt: Tritt nämlich ein Primärelektron mit den Elektronen des Festkörpers in Wechselwirkung, so werden die Wirkungsquerschnitte des Streuvorgangs durch Matrixelemente mit antisymmetrischen Eigenfunktionen beschrieben. Dies hat zur Folge, daß die Wirkungsquerschnitte im wesentlichen durch zwei Komponenten bestimmt sind, durch die sogenannte direkte Streuamplitude  $f(\theta)$  und durch die Austauschamplitude  $g(\theta)$ .

Unter der Vorgabe, diese beiden Streumechanismen genauer zu charakterisieren, wurden winkelaufgelöste EELS-Untersuchungen zum Verhalten der Streuintensitäten der  $3d^n-3d^n$ -Kristallfeldübergänge an epitaktischen NiO(001) und MnO(001) Oberflächen im gesamten  $2\pi$  Halbraum durchgeführt. Während es sich im Falle des NiO dabei um Übergänge handelt, bei denen die Spinmultiplizität erhalten bleibt (Triplett-Triplett-Übergänge,  $\Delta S=0$ ) oder reduziert wird (Triplett-Singulett-Übergänge,  $\Delta S=-1$ ), liegen beim MnO ausschließlich Endzustände mit reduzierter Spinmultiplizität vor (Sextett-Quartett-Übergänge,  $\Delta S=-1$ ). Unter der Voraussetzung einer vernachlässigbaren Spin-Bahn-Kopplungen der 3d Elektronen kann die Anregung der ( $\Delta S=-1$ )-Übergänge ausschließlich durch Austauschstreuung erfolgen, während die Anregung der ( $\Delta S=0$ )-Übergänge durch beide Streumechanismen möglich ist. Es stellt sich heraus, daß die direkte Streuung eine langreichweitige Wechselwirkung darstellt, und somit die direkte Streuamplitude einzig die Periodizität der Oberfläche in Form LEED-ähnlicher Streuverteilungen widerspiegelt, unabhängig von der Symmetrie der Wellenfunktion des angeregten Endzustandes. Im Gegensatz hierzu stellt sich die Austauschstreuung als eine lokale Wechselwirkung dar, deren Streuamplitude ausschließlich durch die Symmetrie der lokalisierten Endzustände bestimmt wird, unabhängig davon, ob es sich um multiplizitätserhaltende oder multiplizitätsändernde Übergänge handelt.

Dadurch, daß es sich bei MnO und NiO um zwei Systeme mit invertierbaren Anfangs- und Endzustandskonfigurationen handelt, ist es möglich, speziell die Austauschstreuung auch unter dem Gesichtspunkt der Zeitumkehrinvarianz (Reziprozitätstheorem) zu untersuchen. Ein direkter Vergleich der Streuverteilungen des  $^3A_{2g} \rightarrow ^1A_{1g}$ -Übergangs im NiO und des  $^6A_{1g} \rightarrow ^4A_{2g}$ -Übergangs im MnO liefert einen deutlichen Hinweis darauf, daß die für elastische Streuprozesse geltende Zeitumkehrinvarianz auch bei inelastischen Streuprozessen ihre Gültigkeit behält.

Aufgrund der sehr hohen Oberflächenempfindlichkeit elektronenspektroskopischer Methoden, war es notwendig, für die angestrebten Untersuchungen Oberflächen mit hoher struktureller Qualität herzustellen, so daß neben den o.a. Fragestellungen auch die Präparation und Charakterisierung epitaktischer NiO/Ni(001)-, NiO/Ag(001)- und MnO/Ag(001)-Oberflächen in sehr ausführlicher Weise diskutiert werden.